



FACULTAD DE CIENCIAS

CURSO DE POSTGRADO

Nombre del curso	Espectroscopía Vibracional
Tipo de curso (Obligatorio, Electivo, Seminario)	Electivo
Nº de horas totales (Presenciales + No presenciales)	3 + 12 = 15 hrs semanales, 270 hrs semestrales
Nº de Créditos	10
Fecha de Inicio – Término	16/03/2023 – 20/01/2023
Días / Horario	Jueves 14:30 – 15:45, 16:15 – 17:45
Lugar donde se imparte	Laboratorio de Espectroscopia Vibracional, Departamento de Química
Profesor Coordinador del curso	Álvaro Aliaga Cerón
Profesores Colaboradores o Invitados	Carlos Garrido, José Cárcamo.
Descripción del curso	Las técnicas de amplificación de señal vibracional son conocidas genéricamente como SERS (Raman) y SEIRA (infrarrojo). Su aplicación es relevante en química analítica y bioquímica, pues los fenómenos de amplificación permiten acceder a límites de detección cercanos a una molécula o biomolécula. Se revisan aplicaciones en los campos de la detección de contaminantes ambientales, de sistemas biológicos desde aminoácidos a proteínas y tejidos humanos, hasta su uso en estudios del patrimonio artístico. Sobre la base de resultados en diversos ámbitos del conocimiento, se discute la relevancia del SEVS como herramienta analítica y como precursor en estudios de interfaces.
Objetivos	Conocer y aplicar nuevas técnicas vibracionales en infrarrojo y Raman desarrolladas en torno de superficies nanoestructuradas metálicas.
Contenidos	I.- FUNDAMENTOS DE LA TECNICA SEVS: SEIRA y SERS (SEVS Amplificación de señales vibracionales por efecto de superficies metálicas nanoestructuradas; SEIRA absorción infrarroja amplificada por superficies; SERS amplificación Raman amplificada por superficies) Fundamentos teóricos Infrarrojo, Raman. Origen de los espectros SEVS. Líneas de excitación. Simetría molecular. Teoría de Grupos. Reglas de selección. Complementariedad SERS e SEIRA. Orientación y organización molecular sobre superficies. Espectros SERS de resonancia. II.- INSTRUMENTACION Equipos comerciales (Raman dispersivos, FT-Raman, otros). Componentes de los equipos Infrarrojo y Raman, más accesorios. Tratamiento muestras y registro de espectros.

	<p>III. APLICACIONES Preparación y caracterización estructural de nanopartículas metálicas de Au, Ag, Cu. Espectroscopía SEIRA y SERS de azocompuestos. SEVS en la detección de trazas de contaminantes atmosféricos, en solución y sólidos. Uso de ensambladores moleculares. SERS y SERS resonante en nanotubos de carbono. SERS de especies de O,C,N,S cercanas a la superficie. Ensambladores bipyridínicos dicatiónicos. Raman y SERS de aminoácidos, péptidos, proteínas y tejido humano. IR, Raman y SERS de material arqueológico y muestras patrimoniales.</p> <p>IV. MEDICION DE ESPECTROS Y ANALISIS DE MUESTRAS Medición e interpretación de espectros de cerámicos arqueológicos. Análisis de muestras de interés para el estudiante. Muestras patrimoniales y biológicas</p>
<p>Modalidad de evaluación</p>	<p>Revisión de casos (RC). Se plantean trabajos de investigación y el/la estudiante debe analizar e interpretar los resultados. Talleres de medición (TM). Se proponen muestras, se registran espectros Raman y se interpretan. (30%) Propuesta de investigación (PI). Se propone un tema propio y se apoya con literatura, a fin de exponer oralmente un tema que constituya una propuesta de estudio mediante SEVS. <i>Nota = RC x 0,4 + TM x 0,3 + PT x 0,30</i></p>
<p>Bibliografía</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. R. Aroca. Surface-enhanced Vibrational Spectroscopy. John Wiley & Sons, Chichester 2006. 2. Surface Enhanced Raman Spectroscopy. Analytical, Biophysical and Life Science Applications. Edited by Schlücker, Ed.. Wiley-VCH. Chapter 5. Detection of Persistent Organic Pollutants by Using SERS. Sensors Based on Organically Functionalized Ag Nanoparticles. L. Guerrini, P. Leyton, M. Campos-Vallette, C. Domingo, J.V. Garcia-Ramos and S. Sanchez-Cortes. 3. New Approaches in Biomedical Spectroscopy, Ed. K. Kneipp, R. Aroca, H. Kneipp and E. Wentrup-Byrne. Chap. 10. Surface Enhanced Raman Spectroscopy and Surface Enhanced Infrared Absorption- Based Molecular Sensors. Selective detection of PAHs employing different silver nanoparticles functionalization methods. C. Domingo, L. Guerrini, P. Leyton, M.M. Campos Vallette J.V. García Ramos and S. Sánchez Cortés. Pags. 138-151. ACS Symposium series vol. 963 (2007). 4. Técnicas de caracterización de materiales de carbono: desde los nanotubos a las sustancias húmicas. Comité de Espectroscopía, Sociedad Española de Óptica. Escuela de Verano de la Universidad de Zaragoza, Junio del 2006. Capítulo 16. Detección de PAHs mediante espectroscopía SERS sobre superficies metálicas funcionalizadas con calixarenos. J.V. García Ramos, S. Sánchez Cortés, P. Leyton y M.Campos Vallette. Págs. 313-324. 5. Nanomaterials: Synthesis Properties and Applications, A. S. Edelstein and R. C. Cammarata, Editor J. W. Arrowsmith Ltd. Bristol, 2002. 6. Self-Assemblies: The Synkinetic Approach, J. Z. Zangh, Z. Wang, J.Liu, G.Liu, Academic/Plenum Publisher, New York 2003.